非線型格子振動とエルゴード性 (近似計算とシミュレーションによる近似解法研究会報告集)

斉藤, 信彦; 広岡, 一

数理解析研究所講究録
51巻 1968年 111-122

非線型格子振動とエルゴード性

早大 理工　斎藤信彦
広岡 一

§1 非調和性とエルゴード性

格子振動をharmonic近似で取扱う限り，いつでもノーマルモードに分けられる。ノーマルモードは独立であって，その間にエネルギーの交換は行なわれないから，1つのノーマルモードにエネルギーを与えると，いつまでもそのエネルギーは，そのノーマルモードにのみとどまっている。もしこの系が熱力学的であって，熱平衡に達することができるものとすると古典系とみなされる限り，すべてのノーマルモードにエネルギーは等分配されていなければならない。したがってharmonic oscillatorの近似では，熱平衡への接近の問題を議論することは出来ない。

実在の系では多少とも非調和性があって，そのために熱平衡の成立が保証されているのだろうと考えられる。非線形の多自由度の振動の問題は数学的に難しいために，具体的に解いてこれを示すことができず，物理学者は

すべての責を非線形性におしつけ，非線形こそ救いの神であると信じていた。

しかし電子計算機の発達によって事情は一変した。計算機実験によって問題の質的な性格を発見することが出来るようになったからである。計算機をつかって非線形振動子系のエルゴード性をしらべた最初の試みは Fermi, Pasta, Ulam[1),2)]である。

一次元の格子の振動を考える。i番目の粒子の運動は

$$m\ddot{y}_i = K(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) + \\ + \lambda\{f(y_{i+1} - y_i) - f(y_i - y_{i-1})\} \qquad (1)$$

（微分差分方程式）

である。右辺の第２項が非線形項であって，３乗のポテンシャルでは　$f(y) \propto y^2$，　４乗のポテンシャルでは　$f(y) \propto y^3$　である。連続の極限では

$$m\, y_{tt} = K[1 + \lambda'(y_x)^p]\, y_{xx} \qquad (2)$$

（微分微分方程式）

とかくことができる。ここで p は，３乗又は４乗のポテンシャルに応じて　１又は２　である。

(1)の左辺の時間微分を差分でおきかえた近似をつかうこともできる。その式は(2)に対する差分近似と

みなすこともできる。時間について離散化した変数を y_i^j とかき、時間間隔を h とすると

$$\frac{m}{h^2}\,\delta_j^2\, y_i^j = K\left(1+\lambda\left(y_{i+1}^j - y_{i-1}^j\right)^p\right)\delta_i^2\, y_i^j \qquad (3)$$

（差分差分方程式）

と表わすことができる。こゝで δ_i^2, δ_j^2 は空間又は時間に対する2階の差分オペレーターである。

  粒子は $i=0, 1, 2, \cdots, N$ とし、$i=0$ と $i=N$ とは固定する。(1)の系の調和振動子近似における規準振動は

$$\omega_k = 2\left(\frac{K}{m}\right)^{1/2} \sin\frac{k\pi}{2N}, \quad k=1, 2, \cdots, N-1. \qquad (4)$$

である。

$$y_i = \left(\frac{2}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{k=1}^{N-1} x_k \sin\frac{ik\pi}{N} \qquad (5)$$

によって規準座標 x_k を導入すると、非線形項をもった(1)式は一般に

$$\ddot{x}_k = -\omega_k^2 x_k + \lambda \sum A_{krs} x_r x_s \qquad (6)$$

とかき直される。但しこゝでは $p=1$ としたが、$p=2$ のときは右辺の第2項は3次の式となる。

  F.P.U は $N=32$, $K/m=1$, $\lambda=1/4$, $h^2=1/8$ に対し一番低い規準振動に sine の形を与え、そのエネ

ルギーが高い規準振動にどのようにうつるかをみた。ところが意外なことに，2, 3, 4, … の低いモードにはいくらかのエネルギーはうつるが，高いモードにはほとんどうつらず，しかもある時間がたつと，一番最初にエネルギーを与えた最低のモードにほとんどすべてのエネルギーがかえってしまった。はじめに予期したようなエネルギーの等分配はおこらなかった。Fermi らは力を2乗のときも3乗のときも，また broken linear force のときもしらべ，初期条件やその他の条件もかえたが，ほぼ同一の結論であった。

その後この研究に関していろいろな考えがおこった。1961年 Tuck と Menzel[3] はもっと長い時間に関しての挙動をしらべた。FPU が見出したように，ある時間がたつと，再びはじめの状態にかえるが，2周目にはその誤差が少し増え，3, 4, … 周毎に誤差はふえ 8周目には 8% ほどになった。ところが更に時間をかけると，こんどは誤差が減少し，16周目には第1周目よりもっとはじめの状態に近ずいた。

一方 Hemmer[4] は (4) の ω_k の間に

$$\sum n_k \omega_k = 0 \qquad (7)$$

が成り立つような整数 n_k の全部が0でないような組が

あるためには（共鳴条件）、N が素数であるか、2のべき数以外でなければならないことを示した。FPUは $N=16, 32, 64$ の場合を計算している。このときは共鳴条件(7)を満たさない。Ford[5]はモードの間に十分なエネルギー交換をおこすには(4)の条件が必要であることを示し、計算機でそのいくつかの例を示した。たとえば $N=6$ に対する(4)の振動数 $\omega_1=(2-\sqrt{3})^{\frac{1}{2}}$, $\omega_2=1.0$, $\omega_3=\sqrt{2}$, $\omega_4=\sqrt{3}$, $\omega_5=(2+\sqrt{3})^{\frac{1}{2}}$ で、ある3次の力であらわされる相互作用に対し1のモードにエネルギーを与えても4, 5のモードにはあまりエネルギーはうつらないが $\omega_1=0.4$, $\omega_2=0.8$, $\omega_3=1.2$, $\omega_4=1.6$, $\omega_5=2.0$ と少しずらして(7)を満すようにするとエネルギー分配の様子はぐんと変ってそのようすはdramaticであることを示した。

Jackson[6]は(7)の共鳴条件は非調和性 λ の小さいときであって、λ の大きいときには

$$\sum n_k \Omega_k(\lambda) = 0$$

でなければならないことを示した。Ω_k は λ があるために ω_k からシフトした振動数である。Jacksonはエルゴード性がえられないのは ω_k の間に(7)の条件がないか

らばかりでなく，Ω_kに影響を与えるモード間の相互作用や初期条件も重要であることを示し，特に不純物があればエネルギー交換が行われやすいことを計算機実験でたしかめた。

調和振動子系を基準振動でみれば独立な系のあつまりであるが，粒子系のまゝでみれば強い相互作用をしている系である。それ故，見方を変えれば調和振動子系でも不可逆性を示したり，熱平衡に接近するようにみえたりする。たとえば力学的平衡にあって静止している系に，一つの粒子にある時刻から一定の力を加える。この系についてすべての粒子につき，その速度の2乗の長時間平均をしらべると，十分長い間には，かつ十分粒子の数が多いと，粒子の番号によらず一定になることがわかる。これだけみるとこの系は一定の温度をもった熱平衡状態に達したようにみえる。しかし，粒子間の速度の相関をしらべると，隣り合った粒子間については0にならない。このことは系が完全に熱平衡に達したことを意味しない。そこで非調和性を入れてこの性質がどのようにかわるかをしらべてみると，定性的には調和振動子のばあいと同じであることがわかった。ここでも非調和性はエルゴード性を保証してくれなかった。(Saito, Hiraoka[7])

粒子間の相互作用を取上げることも重要である。Northcote and Potts[8]は　2つの粒子間に harmonic + hard core の力を仮定した。計算機による実験ではエネルギーの各モードへの等分配が極めてよく成りたった。second neighbor の相互作用を入れた試みもある。前述の粒子系としての見方において，同様な条件の下に，速度の2乗および隣りの粒子の速度との相互作用をしらべると，前者は一定の値に近ずくが，後者は0にならない。

粒子数が少いときには，エネルギー等分配や熱平衡への接近を可能にするには，hard core ポテンシャルのような大きい非線形性が必要のようである。

§2、解決法

以上のべたことで，非調和性だけでエルゴード性がえられるという単純な期待　をもつことが出来ないことがおわかりと思う。一次元の力学系ではエルゴード性はないという Kolmogorov[9]の主張もある。§1でのべたことは，しかしながら，必らずしも一次元系の特徴ではない。粒子数は必然的に小さくなるが，二次元の振動子系に対する基準振動へのエネルギー分配をしらべてみると（Hirooka, Saito）一次元系とほとんど同じであることがわかる。

そこで(1)～(3)の方程式の解の不安定性やbreak downに解決をみようという考えが有力になった。たとえばZabusky, Kruskal[10]は(2)の微分微分方程式を変形して非線形流体力学の式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u\, u_x$$

の類似からあるところでショックが生じ，それ以上は解の唯一性が失われると考えた。このようなbreak downのおこることがergodicityのために必要だとした。break downのおこるところは，彼らの示したところによると，FPUの実験では第一の周期[12]に対して余程小さいところである。(3)の差分差分方程式でしらべたFPUの解ではそこでは何の異常も生じていない。(3)はしばしば(2)の解のために使われ，ある条件の下に(3)の解は(2)の解に近ずくことがわかっている。しかし差分が有限であるとき，(2)と(3)とに解の性質に大きな差があるのかも知れない。もしそうなら，(1)と(3)の間にもあるかも知れない。Zabuskyのいうbreak downが(1)でおこるかどうかは不明である。

一方，Chirikov[11]らは4次のポテンシャルをもつ系にえまし，基準振動になおして

$$\ddot{Q}_k + \omega_k^2 Q_k = -\frac{\beta}{8N}\sum B_{pqs}\, Q_p Q_q Q_s$$

の方程式の解の性質をしらべた。右辺の項のうち，適当なものを左辺にうつして近似的に

$$\ddot{Q}_k + \omega_k^2 Q_k \left\{ 1 - \frac{3\beta}{4N}\omega_k^2 (2-\omega_k^2) Q_k^2 \right\}$$

$$= \frac{\beta}{8N}\sum F_{km}\cos\vartheta_{km}$$

とする。ここで右辺は外力とみなす。この解を

$$Q_k = C_k(t)\cos\vartheta_n(t)\ , \quad \dot{\vartheta}_n = \omega_n'(t)$$

として，

$$\dot{C}_k = \frac{\beta F_{km}}{16\omega_k' N}\sin\psi_{km}, \quad \vartheta_k = \vartheta_{km} - \psi_{km}$$

$$\dot{\psi}_{km} = \omega_{km}' - \omega_k + \frac{\beta F_{km}}{16 C_k \omega_k' N}\cos\psi_{km}$$

がえられるが，$C_k(t)$の変化がゆるやかであるためには

$$X = \frac{|\dot{\psi}_{km}|^2_{max}}{(\Delta\omega)^2} \ll 1,$$

又は

$$\frac{\beta F_{km}}{4N\omega_k'}\ \frac{d\Omega_{km}}{dC_k}\ \frac{1}{(\Delta\omega)^2} \ll 1$$

でなければならない。$\dot{\psi}_{km}$は$C(t)$の変化のfrequencyである。

$X > 1$では振幅のmodulationが乱雑になって，stochastic

な性質をもちはじめると考えた。また十分粒子数が大きければ、ほとんどつねにstochasticな領域にあって、エルゴード性が保証されているのだろうと考えた。

これらの点については今後十分検討をして行かなければならない。

文献

1) Fermi, Pasta, Ulam : Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1940 (1955)

2) Fermi : Collected Papers vol 2. p.977

3) 2)をみよ

4) P.C. Hemmer : Dynamic and stochastic type of motion in the linear chain, thesis, Trondheim, 1959.

5) J. Ford : J. Math. Phys. 2 (1961) 387. Ford, Waters : ibid. 4 (1963) 1293

6) E.A. Jackson : J. Math. Phys 4 (1963) 551; 4 (1963) 686.

7) Saito, Hirooka : J. Phys. Soc. Japan 23 (1967) 157, 167.

8) R.S. Northcote, R.B. Potts : J. Math. Phys. 5 (1964) 399

9) A. N. Kolmogorov ; Proceedings of the International Congress of mathematicians, Amsterdam, (North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1957), Vol. 1, pp. 315-333. (文献5)から引用)

10) N. Zabusky ; J. Math. Phys. 3 (1962) 1028
M. K. Kruskal , N. J. Zabusky ; J. Math. Phys. 5 (1964) 231

11) F.M. Israilijev, B.V. Chirikov ; "The statistical properties of nonlinear string", Novosibirsk , 1965.